



Universidad de Concepción

Facultad de Ingeniería

Departamento de Ingeniería Química

**FENÓMENOS ISOPÍCNICOS Y BAROTRÓPICOS: TENSIÓN
INTERFACIAL, SIMULACIÓN MOLECULAR EN MEZCLAS
BINARIAS Y EXTENSIÓN A SISTEMAS TERNARIOS**

María José Tardón Sepúlveda

Tesis presentada a la Escuela de Graduados de la Universidad de Concepción para optar al
grado de

**Doctor en Ciencias de la Ingeniería con mención
en Ingeniería Química**

Concepción, Chile, Noviembre de 2012

Comisión Evaluadora:

Dr. Andrés Mejía Matallana

Dr. Marcelo Zabaloy

Profesor Guía:

Dr. Hugo Segura Gómez

Resumen

Las mezclas compuestas por CO₂+hidrocarburos están asociadas a una cantidad generosa de operaciones de separación típicas de la industria de procesos químicos como la extracción fluido-fluido (en diversos rangos de presión), absorción, adsorción y destilación y donde los fenómenos interfaciales juegan un rol clave en su desempeño eficiente.

Generalmente, los procesos de separación se encuentran caracterizados por bajas tensiones interfaciales entre las fases inhomogéneas líquidas-vapor o líquida-líquida, y por lo tanto la tensión interfacial es una propiedad física importante que los controla.

La recuperación de gas por condensación cercana al punto crítico o la recuperación de aceites en tratamientos secundarios o terciarios mediante un agente de desplazamiento, tal como ocurre con la introducción de un solvente supercrítico como el dióxido de carbono en los procesos de separación, ha tenido muchas ventajas económicas y ambientales. Sin embargo, el desarrollo de técnicas modernas más eficientes de separación como aquellas, tiene un intrincado nexo con el comportamiento de las fases en mezcla, las que pueden desarrollar una compleja gama de comportamientos que deben tenerse en cuenta tanto en etapas preliminares, como el diseño del proceso y en etapas posteriores, como la determinación de las condiciones óptimas de operación.

Una manera de predicción fiable de diferentes propiedades, condiciones y los singulares tipos de equilibrio de fases de mezclas, son las ecuaciones de estado. Modelos capacitado para predecir el equilibrio de fases de los fluidos puros, de las mezclas que estos constituyen y las propiedades termo-físicas que están vinculadas a estados fluidos homogéneos y heterogéneos.

Existen numerosos métodos para determinación de propiedades interfaciales de fluidos puros y mezclas, y entre ellos destaca una teoría exitosamente aplicada para calcular la tensión superficial de mezclas binarias y ternarias y en la que se incorpora a través de un modelo de ecuación de estado, como la de van der Waals, el cálculo del equilibrio de fases y el cálculo de las propiedades interfaciales: **La teoría del Gradiente**.

El primer objetivo de la tesis de investigación corresponde a la caracterización del fenómeno de inversión de densidad molar en condiciones de equilibrio de fases de mezclas binarias, a nivel de fase seno e interfases mediante un enfoque descriptivo muy